

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой  
цифровых технологий



С.Д.Кургалин  
30.06.2018 г.

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Б1.В.ДВ.02.01 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР**

**1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**

02.03.01 Математика и компьютерные науки

**2. Профиль подготовки/специализация:** для всех профилей

**3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр

**4. Форма обучения:** очная

**5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** цифровых технологий

**6. Составители программы:** Клиских Александр Федотович, доктор физико-математических наук, профессор

**7. Рекомендована:** Научно-методическим советом факультета компьютерных наук (протокол № 6 от 25.06.2018)

**8. Учебный год:** 2020-2021, 2021-2022

**Семестр(ы):** 6, 7

**9. Цели и задачи учебной дисциплины:** обучение студентов построению математических моделей наноструктур, анализу этих моделей, развитие у студентов навыков интерпретации получаемых результатов.

**10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:** дисциплина относится к вариативной части блока Б1. Для успешного освоения дисциплины необходимо предварительное изучение курса математического анализа и дифференциальных уравнений.

**11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):**

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ПК-1	Способность к определению общих форм и закономерностей отдельной предметной области.	<p>знать: математический аппарат физики наноструктур; принципы построения и анализа математических моделей наноструктур, применяемых в современных технологиях;</p> <p>уметь: доказывать основные положения и решать стандартные задачи;</p> <p>владеть: навыками интерпретации получаемых результатов.</p>
ПК-5	Способность использовать методы математического и алгоритмического моделирования при решении теоретических и прикладных задач.	<p>знать: методы математического и алгоритмического моделирования наноструктур;</p> <p>уметь: выбирать и адаптировать существующие методы для построения моделей наноструктур;</p> <p>владеть: навыками выбора и адаптации существующих методов моделирования наноструктур.</p>

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час — 5/180.**

**Форма промежуточной аттестации:** 6 семестр – зачёт; 7 семестр – зачёт с оценкой.

**13. Виды учебной работы**

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)		
	Всего	По семестрам	
		6 сем.	7 сем.
Аудиторные занятия	82	50	32
в том числе:			
лекции	50	34	16
практические			
лабораторные	32	16	16
Самостоятельная работа	98	58	40
Экзамен			
Итого:	180	108	72

### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
<b>1. Лекции</b>		
1.1	Моделирование в физике наноструктур.	Основные понятия физики наноструктур. Предмет и основные задачи курса. Основные понятия и базовые модели наноструктур. Размерный эффект. Постановка и анализ задач компьютерного моделирования.
1.2	Математические модели равновесных наноструктур.	Модели энергетического спектра гетероструктур. Метод трансфер-матрицы. Уравнение на спектр и его анализ. Постановка задачи компьютерного анализа спектральной задачи. Модели энергетического спектра наноструктур.  Развитие метода трансфер-матрицы. Уравнение на спектр. Компьютерный анализ особенностей спектра модельных наносистем. Статистические модели в физике равновесных наноструктур.  Основные квантовые статистические распределения. Компьютерная реализация статистических распределений для наноструктур (методы Монте-Карло и молекулярной динамики). Спиновые степени свободы наносистем.  Математические модели описания спиновых степеней свободы. Спиновая матрица плотности.
1.3	Математические модели неравновесных наноструктур.	Модели наноструктур во внешнем электрическом поле.  Система уравнений Пуассона-Шрёдингера. Постановка задачи компьютерного моделирования. Модели наноструктур во внешнем магнитном поле.  Однородные и локализованные магнитные поля. Динамика заряда во внешнем магнитном поле. Задача Ландау: численное решение. Анализ роли граничных условий. Оптические свойства наносистем: базовые модели.  Уравнения Максвелла для кристаллов. Спектр фотонного кристалла. Учёт размерных эффектов. Модели магнитных наноструктур.  Модели Изинга.
1.4	Математические модели процессов переноса в наноструктурах.	Модели переноса заряда в наноструктурах. Теория одномерного переноса заряда в модельных системах. Метод трансфер-матрицы. Моделирование вольт-амперных характеристик модельных систем. Перенос заряда во внешнем магнитном поле. Спинтроника: основные модели. Математическое моделирование процессов переноса в наноструктурах.
1.5	Наноструктуры как открытые физические системы: модели самоорганизации.	Синергетический подход в физике наносистем. Модель Гинзбурга-Ландау как базовая модель процессов самоорганизации.

<b>2. Лабораторные занятия</b>		
2.1	Моделирование в физике наноструктур.	<p>Основные понятия физики наноструктур. Предмет и основные задачи курса. Основные понятия и базовые модели наноструктур. Размерный эффект. Постановка и анализ задач компьютерного моделирования.</p>
2.2	Математические модели равновесных наноструктур.	<p>Модели энергетического спектра гетероструктур. Метод трансфер-матрицы. Уравнение на спектр и его анализ. Постановка задачи компьютерного анализа спектральной задачи. Модели энергетического спектра наноструктур.</p> <p>Развитие метода трансфер-матрицы. Уравнение на спектр. Компьютерный анализ особенностей спектра модельных наносистем. Статистические модели в физике равновесных наноструктур.</p> <p>Основные квантовые статистические распределения. Компьютерная реализация статистических распределений для наноструктур (методы Монте-Карло и молекулярной динамики). Спиновые степени свободы наносистем.</p> <p>Математические модели описания спиновых степеней свободы. Спиновая матрица плотности.</p>
2.3	Математические модели неравновесных наноструктур.	<p>Модели наноструктур во внешнем электрическом поле.</p> <p>Система уравнений Пуассона-Шрёдингера. Постановка задачи компьютерного моделирования. Модели наноструктур во внешнем магнитном поле.</p> <p>Однородные и локализованные магнитные поля. Динамика заряда во внешнем магнитном поле. Задача Ландау: численное решение. Анализ роли граничных условий. Оптические свойства наносистем: базовые модели.</p> <p>Уравнения Максвелла для кристаллов. Спектр фотонного кристалла. Учёт размерных эффектов. Модели магнитных наноструктур.</p> <p>Модели Изинга.</p>
2.4	Математические модели процессов переноса в наноструктурах.	<p>Модели переноса заряда в наноструктурах. Теория одномерного переноса заряда в модельных системах. Метод трансфер-матрицы. Моделирование вольт-амперных характеристик модельных систем. Перенос заряда во внешнем магнитном поле. Спинтроника: основные модели. Математическое моделирование процессов переноса в наноструктурах.</p>
2.5	Наноструктуры как открытые физические системы: модели самоорганизации.	<p>Синергетический подход в физике наносистем. Модель Гинзбурга-Ландау как базовая модель процессов самоорганизации.</p>

## 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Моделирование в физике наноструктур.	10		6	18	34
2	Математические модели равновесных наноструктур.	10		6	20	36
3	Математические модели неравновесных наноструктур.	10		6	20	36
4	Математические модели процессов переноса в наноструктурах.	10		6	20	36
5	Наноструктуры как открытые физические системы: модели самоорганизации.	10		8	20	38
	Итого:	50		32	98	180

## 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

При изучении дисциплины рекомендуется использовать следующие средства:

- рекомендуемую основную и дополнительную литературу;
- методические указания и пособия;
- контрольные задания для закрепления теоретического материала;
- электронные версии учебников и методических указаний для выполнения практических работ.

Форма организации самостоятельной работы: подготовка к аудиторным занятиям; выполнение домашних заданий; выполнение контрольных работ.

## 15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Маслов, М.М. Введение в физику наноструктур / М.М. Маслов ; Опенов Л. А. — Москва : МИФИ, 2011. — 80 с. — ISBN 978-5-7262-1525-9. — <URL: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=231514">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=231514</a> >.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Елесин, В.Ф. Физика и техническое применение наноструктур. Лабораторный практикум / В.Ф. Елесин ; Безотосный И. Ю. ; Катеев И. Ю. — Москва : МИФИ, 2008. — 32 с. — ISBN 978-5-7262-1029-2. — <URL: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=231595">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=231595</a> >.
3	Драгунов В. П. Основы наноэлектроники : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по направлению "Электроника и микроэлектроника", специальностям "Микроэлектроника и твердотельная электроника" и "Микросистемная техника" / В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин.— М. : Физматкнига ; Логос, 2006 . — 494 с.
4	Пул Ч. Нанотехнологии / Ч. Пул, Ф. Оуэнс. - М. : Техносфера, 2004.-328 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
5	<a href="http://www.lib.vsu.ru">www.lib.vsu.ru</a> –ЗНБ ВГУ

**16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы** (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Елесин, В.Ф. Физика и техническое применение наноструктур. Лабораторный практикум / В.Ф. Елесин ; Безотосный И. Ю. ; Катеев И. Ю. — Москва : МИФИ, 2008. — 32 с. — ISBN 978-5-7262-1029-2. — <URL: <a href="http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=231595">http://biblioclub.ru/index.php?page=book&amp;id=231595</a> >.

**17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости) — программа Matlab.**

**18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:** лекционная аудитория, оснащённая мультимедийным проектором, компьютерный класс с необходимым программным обеспечением.

**19. Фонд оценочных средств:**

**19.1 Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения**

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС (средства оценивания)
ПК-1	Знать: математический аппарат физики наноструктур; принципы построения и анализа математических моделей наноструктур, применяемых в современных технологиях.	Разделы 1-5	Письменный опрос Контрольная работа
	Уметь: доказывать основные положения и решать стандартные задачи.	Разделы 1-5	Лабораторные работы 1-8
	Владеть: навыками интерпретации полученных результатов.	Разделы 1-5	Лабораторные работы 1-8
ПК-5	Знать: методы математического и алгоритмического моделирования наноструктур.	Разделы 1-5	Письменный опрос Контрольная работа
	Уметь: выбирать и адаптировать существующие методы для построения моделей наноструктур.	Разделы 1-5	Лабораторные работы 1-8
	Владеть: навыками выбора и адаптации существующих методов моделирования наноструктур.	Разделы 1-5	Лабораторные работы 1-8
<b>Промежуточная аттестация</b>			По результатам текущих аттестаций

**19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации**

Для оценивания результатов обучения на экзамене используются следующие показатели:

- 1) знание математического аппарата физики наноструктур; принципов построения и анализа математических моделей наноструктур, применяемых в современных технологиях;
- 2) знание методов математического и алгоритмического моделирования наноструктур;
- 3) умение доказывать основные положения и решать стандартные задачи;

- 4) умение выбирать и адаптировать существующие методы для построения моделей наноструктур;
- 5) владение навыками интерпретации получаемых результатов;
- 6) владение навыками выбора и адаптации существующих методов моделирования наноструктур.

Для оценивания результатов обучения на зачёте с оценкой используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Полное соответствие ответа обучающегося всем перечисленным критериям. Обучающийся демонстрирует высокий уровень владения материалом, ориентируется в предметной области, верно отвечает на все дополнительные вопросы.	Повышенный уровень	Отлично
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует одному или двум из перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы. Допускаются ошибки при воспроизведении части теоретических положений.	Базовый уровень	Хорошо
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трём из перечисленных показателей, обучающийся дает неполные ответы на дополнительные вопросы. Сформированные знания основных понятий, определений и теорем, изучаемых в курсе, не всегда полное их понимание с затруднениями при воспроизведении.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым четырём из перечисленных показателей. Обучающийся демонстрирует отрывочные знания (либо их отсутствие) основных понятий, определений и теорем, используемых в курсе.	–	Неудовлетворительно

Для оценивания результатов обучения на зачёте используются оценки: «зачтено» и «не зачтено».

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Ответ обучающегося соответствует хотя бы половине из перечисленных критериев. Сформированные знания основных понятий, определений и теорем, изучаемых в курсе, возможно с затруднениями при воспроизведении.	Пороговый уровень	Зачтено
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует более чем половине из перечисленных показателей. Обучающийся демонстрирует отрывочные знания (либо их отсутствие) основных понятий, определений и теорем, используемых в курсе.	–	Не зачтено

### 19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

#### 19.3.1 Перечень вопросов для письменного опроса

1. Предмет и задачи курса «Математическое моделирование наноструктур».
2. Уравнение Шрёдингера.
3. Основные понятия физики наноструктур.
4. Понятие спина.

5. Спин в магнитном поле.
6. Размерный эффект.
7. Формирование наноструктур.
8. Атомная система единиц.
9. Квантовые переходы.
10. Основные положения квантовой механики.
11. Классификация наноструктур.
12. Волновая функция. Физический смысл волновой функции.
13. Спиновая динамика.
14. Модель квантовой ямы. Начальные и граничные условия.
15. Спектр и волновые функции электрона в бесконечно глубокой потенциальной яме.
16. Квантовые наноструктуры.
17. Математическая модель энергетической структуры квантовой ямы.
18. Математическая модель туннельных наноструктур.
19. Спиновые состояния.
20. Математическая модель квантовых переходов.
21. Физический смысл волновой функции.
22. Квантовые переходы в системе из двух уровней.
23. Осцилляции Раби.
24. Модели квантовых структур во внешних полях.
25. Модели самоорганизации наноструктур.
26. Базовые модели в спинтронике.
27. Туннельные наноструктуры.
28. Модель квантовой ямы.

### 19.3.2 Перечень заданий для контрольных работ

1. Найти атомную единицу энергии, плотности энергии, индукции магнитного поля, плотности энергии магнитного поля.
2. Записать спектр и волновые функции электрона в модели квантовой ямы.
3. Определить энергию кванта излучения (в эВ), длина волны которого в вакууме равна  $0,63 \text{ мкм}$ ,  $480 \text{ нм}$ .
4. Что понимают под квантовыми переходами и вероятностями переходов?
5. В чём состоит математическая модель динамики спина в магнитном поле?
6. Записать общий вид вектора спинового состояния для электрона.
7. Дана плотность электронных состояний  $9,6 \text{ 1/(мэВ мкм}^2\text{)}$ . Чему равна эта величина в единицах  $1/(\text{эрг нм}^2)$ ?

### **19.3.3 Перечень заданий для лабораторных работ**

1. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме (спектр, волновые функции, плотность распределения).
2. Квантовая яма конечной глубины.
3. Туннельный эффект.
4. Спиновая динамика.
5. Спин в магнитном поле.
6. Моделирование решений уравнений Блоха.
7. Нестационарное уравнение Шрёдингера.
8. Вариационные методы квантовой механики.

### **19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в формах: письменного опроса и контрольных работ. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования, а также в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе контроля знаний на факультете компьютерных наук ВГУ.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний.

При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.